5. Übung zur Statistischen Physik (SS 2013) — Prof. Rohlfing

Ausgabedatum: 07.05.2013 — Abgabedatum: 14.05.2013

Aufgabe 10: Energie-Fluktuation (2 Punkte)

Zeigen Sie im Rahmen des kanonischen Ensembles, dass für die Fluktuation der Energie der Zusammenhang $(\Delta E)^2 = -\frac{\partial}{\partial \beta} \langle E \rangle$ gilt. Zeigen Sie ferner, dass sich unter der Voraussetzung $\langle E \rangle = C\, T$ (z. B. klassisches ideales Gas, klassische/r harmonische/r Oszillator(en) etc.) der in Aufgabe 8 gefundene Zusammenhang $(\Delta E)^2 = \langle E \rangle \cdot k_B T$ ergibt.

Aufgabe 11: Harmonischer Oszillator im kanonischen Ensemble (4 Punkte)

Betrachten Sie einen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit Hamiltonian

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2\,m} + \frac{m\,\omega^2}{2}\, x^2 \,.$$

a) Bestimmen Sie im Rahmen des *klassischen* kanonischen Ensembles den Mittelwert der Energie sowie ihre Fluktuation, die Mittelwerte von p und x sowie die zugehörigen Fluktuationen und die Wärmekapazität.

b) Berechnen Sie erneut den Mittelwert der Energie, aber jetzt im Rahmen der *Quantenmechanik*. Untersuchen Sie das Verhalten der Energie und der Wärmekapazität im Grenzfall tiefer und hoher Temperaturen und diskutieren Sie Unterschiede und Gemeinsamkeiten zu den Ergebnissen aus a).

c) Nochmals klassisches kanonisches Ensemble: Addieren Sie zur Hamilton-Funktion eine Anharmonizität $-\alpha\, x^3$ (mit $\alpha > 0$) und untersuchen Sie (für kleine α) den Mittelwert von x. Hierzu betrachten Sie den Anharmonizitäts-Beitrag zum Boltzmann-Faktor als eigenständigen Vorfaktor und entwickeln ihn als Taylor-Reihe (in erster Ordnung) in α. Zeigen Sie, dass $\langle x \rangle$ mit der Temperatur linear zunimmt ($\rightarrow$ Wärmeausdehnung).

Aufgabe 12: Spur und Dichtematrix (4 Punkte)

a) Zeigen Sie, dass die Spur eines Produktes aus zwei Matrizen invariant ist gegen Vertauschung der beiden Matrizen.

b) Zeigen Sie (als Verallgemeinerung von a)), dass die Spur eines Produktes aus M Matrizen invariant ist gegen zyklische Vertauschung der M Faktoren.

c) Zeigen Sie, dass die Spur eines Operators basisunabhängig ist. Verwenden Sie hierbei die Tatsache, dass eine Basistransformation durch eine unitäre Matrix U beschrieben wird, und verwenden Sie die Ergebnisse aus b).

d) Gegeben sei ein quantenmechanischer harmonischer Oszillator im thermischen Gleichgewicht mit einem Wärmebad der Temperatur T. Geben Sie die Dichtematrix an. Verändert sich die Dichtematrix mit der Zeit?

e) Gegeben sei ein quantenmechanischer harmonischer Oszillator, der zur Zeit $t = 0$ im Zustand $\frac{1}{\sqrt{2}}\,(|0\rangle + |1\rangle)$ vorliegen möge. Geben Sie die Dichtematrix zu $t = 0$ an. Verändert sich die Dichtematrix mit der Zeit?